

## СВЕДЕНИЯ О ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

по диссертации Александра Сергеевича Бобкова на тему  
«Квантовохимическое моделирование механизмов сборки аннелированных  
гетероциклических систем с пиррольным ядром в суперосновной среде  
KOH/DMSO», представленной на соискание  
ученой степени кандидата химических наук по специальности  
02.00.04 — Физическая химия.

### 1. Полное и сокращенное наименование организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова  
Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН)

### 2. Ведомственная принадлежность:

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

### 3. Место нахождения: Российская Федерация, 630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д. 9

### 4. Почтовый адрес: 630090, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д. 9

### 5. Список публикаций сотрудников организации по теме диссертации за последние 5 лет:

- 5.1. Borovkov, V.I., Potashov, P.A., Beregovaya, I.V., Shchegoleva, L.N., Molin, Y.N. Primary Radical Cations in Irradiated Poly (isobutylene) (2020) *Journal of Physical Chemistry B*, 124 (32), pp. 7059-7066.
- 5.2. Andreev, R.V., Beregovaya, I.V., Shchegoleva, L.N. Unexpected hydrodefluorination of 3-Cl-tetrafluoropyridine. Interpretation through analysis of the potential energy surface for its radical anion (2020) *Journal of Fluorine Chemistry*, 234, P. 109513
- 5.3. Beregovaya, I.V., Shchegoleva, L.N., Ovchinnikov, D.A., Blinkova, S.V., Borovkov, V.I., Andreev, R.V., Bagryansky, V.A., Molin, Y.N. Dimer Radical Anions of Polyfluoroarenes. Two More to a Small Family (2019) *Journal of Physical Chemistry A*, 123 (51), pp. 10968-10975.
- 5.4. Borovkov, V.I., Shchegoleva, L.N. Magnetic Resonance Characteristics of Negative Polarons in Neat Poly(3-hexyl-thiophene) (2019) *Journal of Physical Chemistry C*, 123 (46), pp. 28058-28065.
- 5.5. Beregovaya, I.V., Andreev, R.V., Shchegoleva, L.N. Pseudorotation of the Benzene Radical Cation Associated with HCN or CH<sub>3</sub>CN Molecules (2019) *Journal of Structural Chemistry*, 60 (10), pp. 1578-1583.

- 5.6. Genaev, A.M., Shchegoleva, L.N., Salnikov, G.E., Shernyukov, A.V., Shundrin, L.A., Shundrina, I.K., Zhu, Z., Koltunov, K.Y. Acid-Catalyzed Versus Thermally Induced C1-C1' Bond Cleavage in 1,1'-Bi-2-naphthol: An Experimental and Theoretical Study (2019) *Journal of Organic Chemistry*, 84 (11), pp. 7238-7243.
- 5.7. Beregovaya, I.V., Shchegoleva, L.N., Borovkov, V.I., Karpov, V.M. Perfluorobenzocyclobutene Radical Anion: A Structurally Flexible Particle (2019) *Journal of Structural Chemistry*, 60 (3), pp. 373-376.
- 5.8. Borovkov, V.I., Bagryansky, V.A., Letyagin, G.A., Beregovaya, I.V., Shchegoleva, L.N., Molin, Y.N. Manifestation of g-tensor anisotropy in the quantum beats of spin-correlated radical ion pairs (2018) *Chemical Physics Letters*, 712, pp. 208-213.
- 5.9. Skolyarova, A.D., Selivanova, G.A., Tretyakov, E.V., Bogdanova, T.F., Shchegoleva, L.N., Bagryanskaya, I.Y., Gurskaya, L.Y., Shteingarts, V.D. Interaction of polyfluorinated 2-chloroquinolines with ammonia (2017) *Tetrahedron*, 73 (9), pp. 1219-1229.
6. **Телефон:** +7 (383) 330-88-50
7. **Адрес электронной почты:** benzol@nioch.nsc.ru
8. **Сайт организации:** <http://web.nioch.nsc.ru>

Сведения заверяю,  
Директор  
Федерального государственного  
бюджетного учреждения науки  
Новосибирского института органической  
химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского  
отделения Российской академии наук,  
доктор физ.-мат. наук, профессор



/Е.Г. Багрянская/